

Санкт-Петербургский государственный университет

Механика и математическое моделирование
Молекулярно-кинетическая теория жидкости и газа

Мишин Лев Дмитриевич

Решение задач неравновесной газовой динамики в приближении
поуровневой кинетики

Магистерская работа

Научный руководитель:
Профессор, д.ф.-м.н., Кустова Е.В.

Рецензент:
Научный сотрудник лаборатории вычислительной аэродинамики,
Институт теоретической и прикладной механики
им. С.А. Христиановича СО РАН
к.ф.-м.н. Шоев Г.В.

Санкт-Петербург
2016

SAINT-PETERSBURG STATE UNIVERSITY

Mechanics and Mathematical Modelling
Molecular Kinetic Theory of Fluids and Gases

Lev Mishin

Solution of non-equilibrium gas-dynamics problems in state-to-state kinetics
approach

Master's Thesis

Scientific supervisor:
PhD, Professor Elena Kustova

Reviewer:
PhD, Researcher, Laboratory of computational aerodynamics,
Institute of Theoretical and Applied Mechanics
Siberian Branch of RAS
Georgiy Shoev

Saint-Petersburg
2016

Оглавление

Введение	2
Течение за фронтом ударной волны	4
2.1 Система уравнений	4
2.1.1 Коэффициенты скорости переходов колебательной энергии	5
2.1.2 Сравнение моделей для коэффициентов скорости VT обменов	8
2.1.3 Коэффициенты скорости диссоциации	12
2.1.4 Уравнения сохранения	15
2.2 Система уравнений в безразмерном виде	16
2.2.1 Уравнения для заселенностей	16
2.2.2 Уравнение движения	17
2.2.3 Уравнение энергии	17
2.3 Интегрирование системы	19
2.4 Распределение макропараметров за фронтом ударной волны	19
Течение в пограничном слое у пластины	26
3.1 Система уравнений	26
3.2 Граничные условия	29
Заключение	31
Список литературы	32

Введение

При решении задач, связанных с описанием входа космических аппаратов и твердых тел в верхние слои атмосферы, необходимо моделирование термически и химически неравновесных течений реагирующих смесей газов. Наиболее детальным описанием неравновесных течений является приближение поуровневой кинетики [1], справедливое в условиях быстрой релаксации поступательно-вращательных степеней свободы и медленной колебательной релаксации и химических реакций. В таких условиях для описания течения недостаточно уравнений сохранения, и система уравнений гидродинамики должна быть дополнена уравнениями детальной колебательно-химической кинетики для заселенностей колебательных уровней. Типичными задачами высотной аэродинамики являются задачи о течении за фронтом ударной волны и в пограничном слое.

При расчете параметров газа в релаксационной зоне за фронтом ударной волны необходимо численно решить систему уравнений, состоящую из уравнений сохранения и уравнений колебательно-химической кинетики. Скорость и сложность вычислений напрямую зависят от количества учитываемых параметров. На данный момент существуют работы по расчету релаксационной зоны за ударной волной в поуровневом приближении с учетом одноквантовых VT переходов, при этом обычно пренебрегают многоквантовыми обменами, так как их вероятности заметно ниже и, соответственно, вклад должен быть незначительным. В настоящей работе рассматривается система уравнений поуровневой кинетики, полученных в нулевом приближении метода Энскога-Чепмена и приведенных в [1], в предположении о том, что поток одномерный и стационарный. Новизна данного исследования заключается в учете различного количества возможных VT переходов и сравнении с результатами полученными при учете однокван-

товых обменов. Используется модель диссоциации Тринора-Маррона [2], результаты расчетов группы Капителли [3] для коэффициентов скорости VT обмена в кислороде и азоте.

В данной работе проведено сравнение двух моделей для коэффициентов скоростей VT переходов в азоте и кислороде, а также исследовано влияние многоквантовых обменов на газодинамические макропараметры. Также подробно рассмотрена и подготовлена к численному решению система уравнений, описывающая двумерное течение газа в пограничном слое у полубесконечной пластины в приближении поуровневой кинетики.

Течение за фронтом ударной волны

2.1 Система уравнений

Рассмотрим детальную колебательную и химическую кинетику за плоской ударной волной в условиях сильной колебательной и химической неравновесности. Поток предполагается одномерным и стационарным. Рассматривается бинарная смесь двухатомного газа A_2 и атомов A с реакциями диссоциации, рекомбинации и VT переходами колебательной энергии. Система уравнений, описывающих одномерное стационарное течение за фронтом ударной волны имеет вид [1]:

$$\frac{d(vn_i)}{dx} = R_i^{vibr} + R_i^{diss-rec}, \quad i = 0, \dots, L, \quad (2.1)$$

$$\frac{d(vn_a)}{dx} = -2 \sum_i R_i^{diss-rec}, \quad (2.2)$$

$$\rho_0 v_0 = \rho v, \quad (2.3)$$

$$\rho_0 v_0^2 + p_0 = \rho v^2 + p, \quad (2.4)$$

$$h + \frac{v^2}{2} = h_0 + \frac{v_0^2}{2}. \quad (2.5)$$

x — расстояние от фронта ударной волны; n_a — количество атомов; i — номер колебательного уровня; n_i — заселенности i -х колебательных уровней; ρ — плотность; v — скорость потока; p — давление; h — удельная энтальпия; R_i^{vibr} — скорости обменов колебательной энергией; $R_i^{diss-rec}$ — скорости диссоциации. В настоящей работе рассматриваются смеси O_2/O и N_2/N . Число колебательных уровней $O_2 : L_{O_2} = 46$ [3], $N_2 : L_{N_2} = 46$ [1].

2.1.1 Коэффициенты скорости переходов колебательной энергии

Рассмотрим уравнения колебательно-химической кинетики (2.1) и (2.2), правые части этих уравнений описывают изменение заселенности колебательных уровней n_i вследствие VT обменов колебательной энергией, реакций диссоциации и рекомбинации:

$$R_i = R_i^{vibr} + R_i^{diss-rec} = R_i^{VT} + R_i^{diss-rec}, \quad (2.6)$$

а также изменение числа атомов в результате химических реакций

$$R_a = -2 \sum_i R_i^{diss-rec}. \quad (2.7)$$

В данной работе не учитываются VV обмены колебательными квантами, так как они слабо влияют на динамику течения за ударной волной. Выражения для скорости изменения заселенностей колебательных уровней молекул вследствие VT переходов имеют вид:

$$R_i^{VT} = \sum_d n_d \sum_{i' \neq i} (k_{ii'}^d n_{i'} - k_{i'i}^d n_i). \quad (2.8)$$

d — химический сорт партнера по столкновению.

Для вычисления R_i^{VT} необходимо знать коэффициенты скорости VT переходов колебательной энергии $k_{ii'}^d$, выражения для этих коэффициентов можно найти в работах [3, 4], эти формулы являются результатом аппроксимации точных траекторных расчетов Г. Биллинга [5, 6]. Рассмотрим коэффициенты скорости VT обмена $k_{i,i-1}^{A_2}, k_{i,i'}^A$:

$$A_2(i) + A_2 \rightarrow A_2(i-1) + A_2, \quad (2.9)$$

$$A_2(i) + A \rightarrow A_2(i') + A. \quad (2.10)$$

Для столкновений с молекулой имеем [4]:

$$k_{i,i-1}^{N_2} = i k_{10}^{N_2} e^{\delta_{VT}(i-1)}, \quad \text{где} \quad (2.11)$$

$$k_{10}^{N_2} = \exp \left[-3, 24093 - 140, 69597/T^{0,2} \right], \quad (2.12)$$

$$\delta_{VT} = 0, 26679 - 6, 99237 \cdot 10^{-5}T + 4, 70073 \cdot 10^{-9}T^2. \quad (2.13)$$

$$k_{i,i-1}^{O_2} = i k_{1,0}^{O_2} e^{\delta_{VT}(i-1)} \quad (2.14)$$

$$k_{1,0}^{O_2} = \frac{T}{1.8 \cdot 10^{12} \exp(122/T^{1/3})(1 - \exp(-2273.7/T))} \quad (2.15)$$

$$\delta_{VT} = \frac{2.99}{\sqrt{T}} \quad (2.16)$$

Размерность коэффициентов cm^3/s . Для случая, когда при VT обмене молекула сталкивается с атомом, существует несколько моделей, по которым могут быть рассчитаны коэффициенты скорости переходов, все они предполагают учет многоквантовых VT переходов.

Модель Биллинга-Капителли

Данная модель является аппроксимацией траекторных расчетов Биллинга [5], выражения для k_{VT} в азоте и кислороде приведены ниже:

$$k_{i,i'}^N = \exp \left[b_0 + b_1(i - i') + b_2(i - i')^2 + i(c_0 + c_1(i - i') + c_2(i - i')^2) \right], \quad i > i'$$

$$k_{i,i'}^O = (3i - 2) \frac{\varepsilon_1^{O_2} - \varepsilon_0^{O_2}}{0.124} \frac{7 \cdot 10^{-14}}{\exp(30/T^{1/3})}$$

константы b_i, c_i приведены в [1]. $\varepsilon_0^{O_2}$ и $\varepsilon_1^{O_2}$ — колебательные энергии первых двух уровней молекулы кислорода, имеют размерность cm^{-1} .

Модель Капителли

Более поздние расчеты группы Капителли, основанные на современных траекторных расчетах [3], с использованием поверхности потенциальной

энергии [7], дают следующие выражения для $k_{i,i'}^O$:

$$k_{i,i'}^O(T) = \frac{1}{27} \exp \left[a_1^{i,i'} + \frac{a_2^{i,i'}}{\ln(T)} + a_3^{i,i'} \ln(T) \right], \quad i > i'$$

$$a_j^{i,i'} = b_{j1}^{i,i'} + b_{j2}^{i,i'} \ln(i) + \frac{b_{j3}^{i,i'} + b_{j4}^{i,i'} i + b_{j5}^{i,i'} i^2}{10^{21} \exp(i)}$$

$$b_{jk}^{i,i'} = c_{jk1} + c_{jk2} \ln(i - i') + c_{jk3} (i - i') \exp(-(i - i')) + c_{jk4} (i - i')^2$$

где коэффициенты $a_j^{i,i'}$, $b_{jk}^{i,i'}$, $c_{jkv}^{i,i'}$ можно найти в работах [3, 8].

Коэффициенты скорости обратных переходов вычисляются на основании соотношений детального баланса [1].

Модель FHO

Траекторные расчеты с помощью методов молекулярной динамики имеют высокую точность, но требуют большого количества вычислительных ресурсов. Такие расчеты были проведены для ряда молекул, включая H_2 , N_2 , O_2 и CO для широкого диапазона температур и колебательных квантовых чисел. Модель нагруженного гармонического осциллятора FHO [9] предполагает, что каждый VT -переход представляется последовательностью "виртуальных" одноквантовых обменов в процессе одного столкновения. Полная вероятность перехода вычисляется путем сложения всех вероятностей возможных способов перехода. Число таких способов, не обязательно уникальное даже для одноквантовых обменов, быстро растет с числом доступных квантовых состояний системы, в которой происходит столкновение, т.е. для многоквантовых обменов, столкновений атом-молекула и, также для высокоэнергетических столкновений. В работе [9] приводится аналитическое выражение вероятности VT -перехода для столкновений атом-молекула:

$$P_{VT}(i \rightarrow i', \varepsilon) = i!i'!\varepsilon^{i+i'} \exp(-\varepsilon) \left(\sum_{r=0}^n \frac{(-1)^r}{r!(i-r)!(i'-r)!} \frac{1}{\varepsilon^r} \right)^2,$$

где i и i' — начальное и конечное состояние молекулы соответственно, $n = \min(i, i')$ и ε — среднее число квантов, переданных изначально осциллятору, не совершающему колебания. Более подробное описание модели

также можно найти в работе [9], в этой же работе указано, что использование траекторных расчетов дает более точный результат.

2.1.2 Сравнение моделей для коэффициентов скорости VT обменов

Проведем расчеты и построим графики для коэффициентов k_{VT} . На графиках видно, что коэффициенты скорости VT переходов для одно- и многоквантовых обменов имеют один порядок, а значит могут существенно влиять на газодинамические параметры. Также можно увидеть различие между коэффициентами для разных газов. Для азота модель FHO, предложенная Адамовичем, и модель Капителли хорошо согласуются друг с другом, при этом, при низких температурах модель Капителли дает более высокие значения коэффициента скорости VT обменов. Для кислорода модели качественно различаются при низких температурах: у Капителли коэффициент k_{VT} зависит от температуры в значительно меньшей степени на всем рассматриваемом диапазоне, для модели FHO картина полностью аналогична азоту. При этом, в большинстве случаев, модель FHO дает более высокие значения коэффициента скорости VT обменов средних и высоких температурах.

По результатам анализа было решено выбрать модель [3] для дальнейших расчетов как наиболее актуальную.

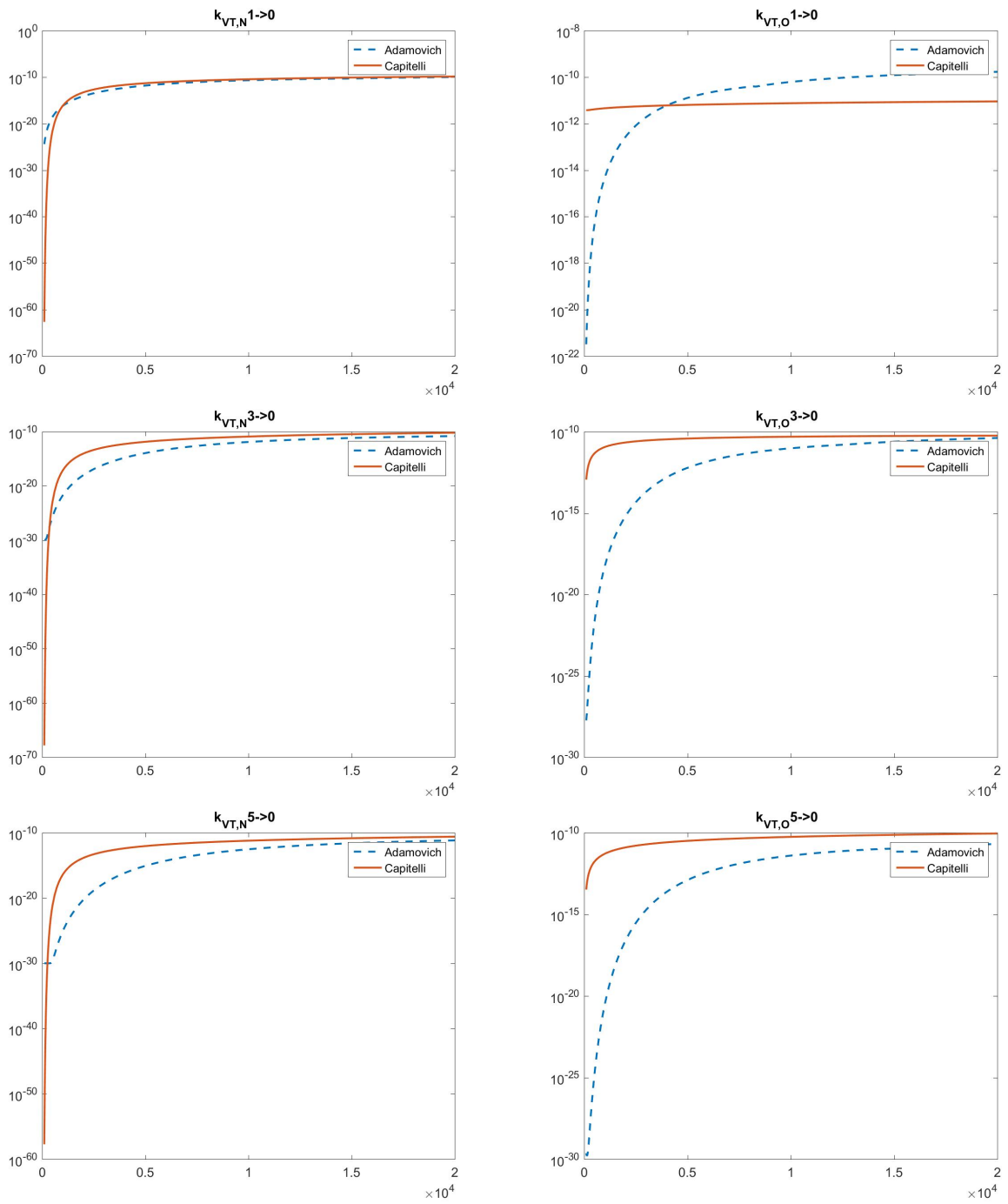


Рис. 2.1: Зависимость коэффициентов скорости VT переходов на 0-й колебательный уровень для моделей ФНО [9] и Капителли [3] в азоте (слева) и в кислороде (справа) от T, K .

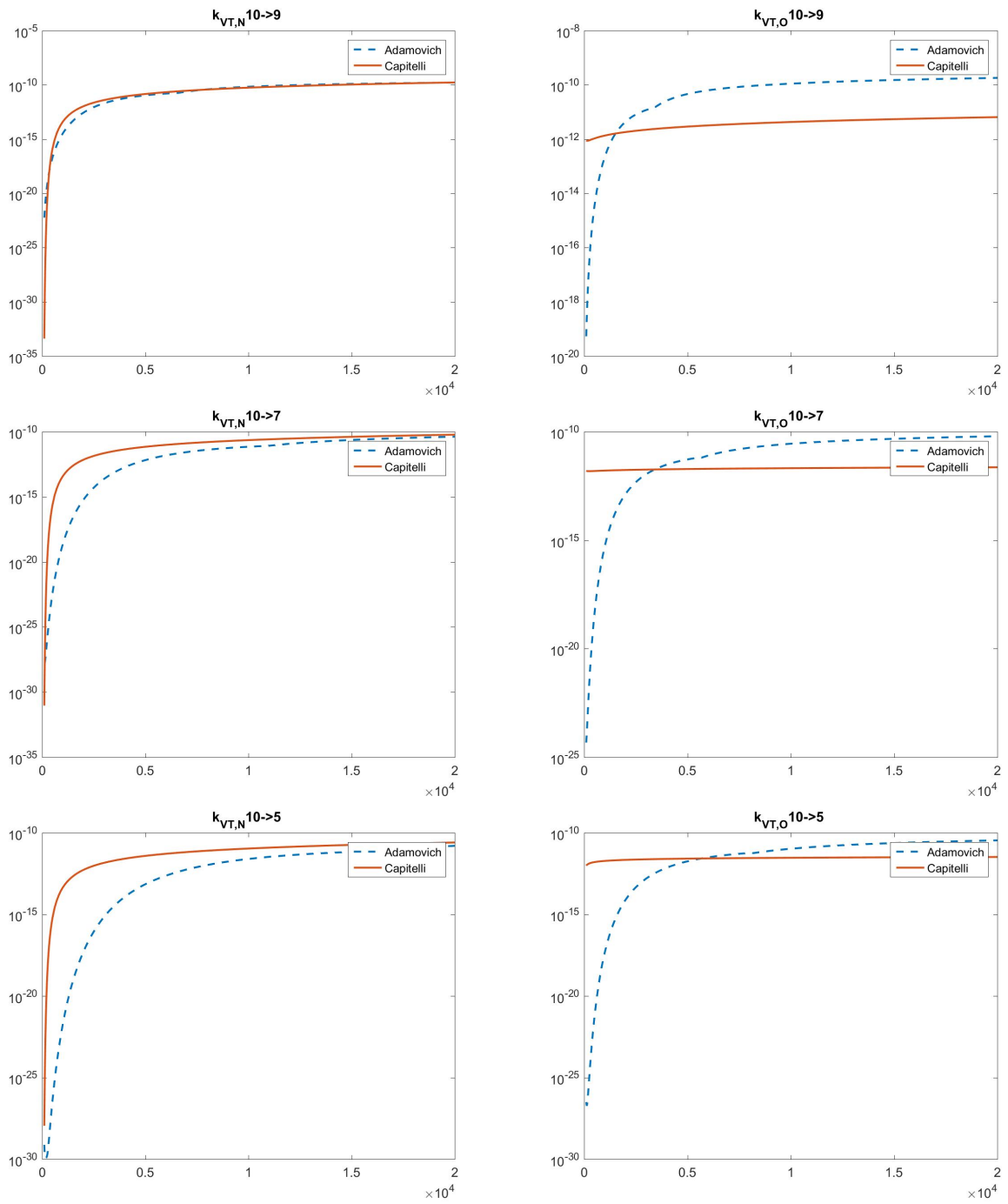


Рис. 2.2: Зависимость коэффициентов скорости VT переходов с 10-го колебательного уровня для моделей FHO [9] и Капителли [3] в азоте (слева) и в кислороде (справа) от T, K .

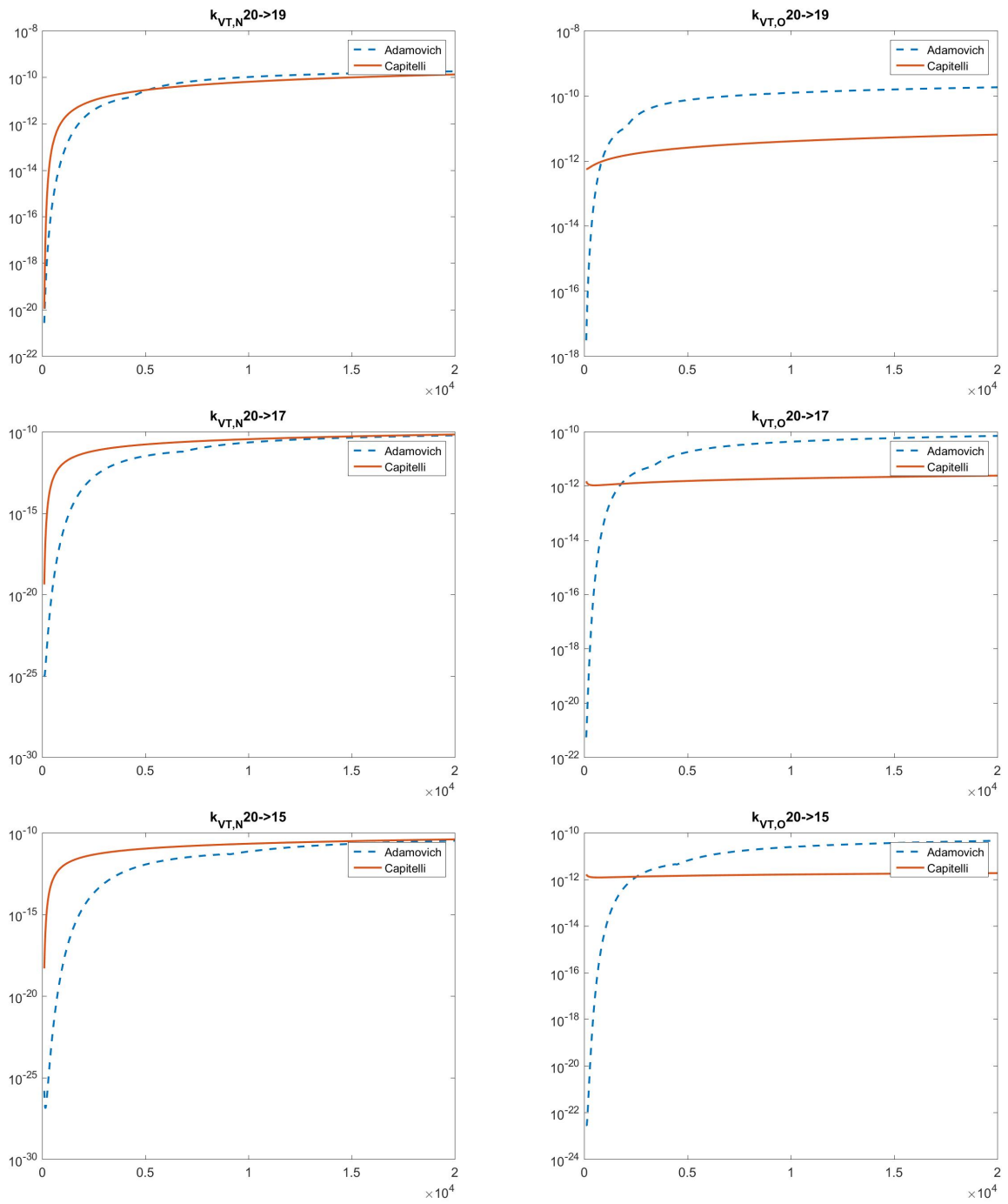


Рис. 2.3: Зависимость коэффициентов скорости VT переходов с 20-го колебательного уровня для моделей ФНО [9] и Капителли [3] в азоте (слева) и в кислороде (справа) от T, K .

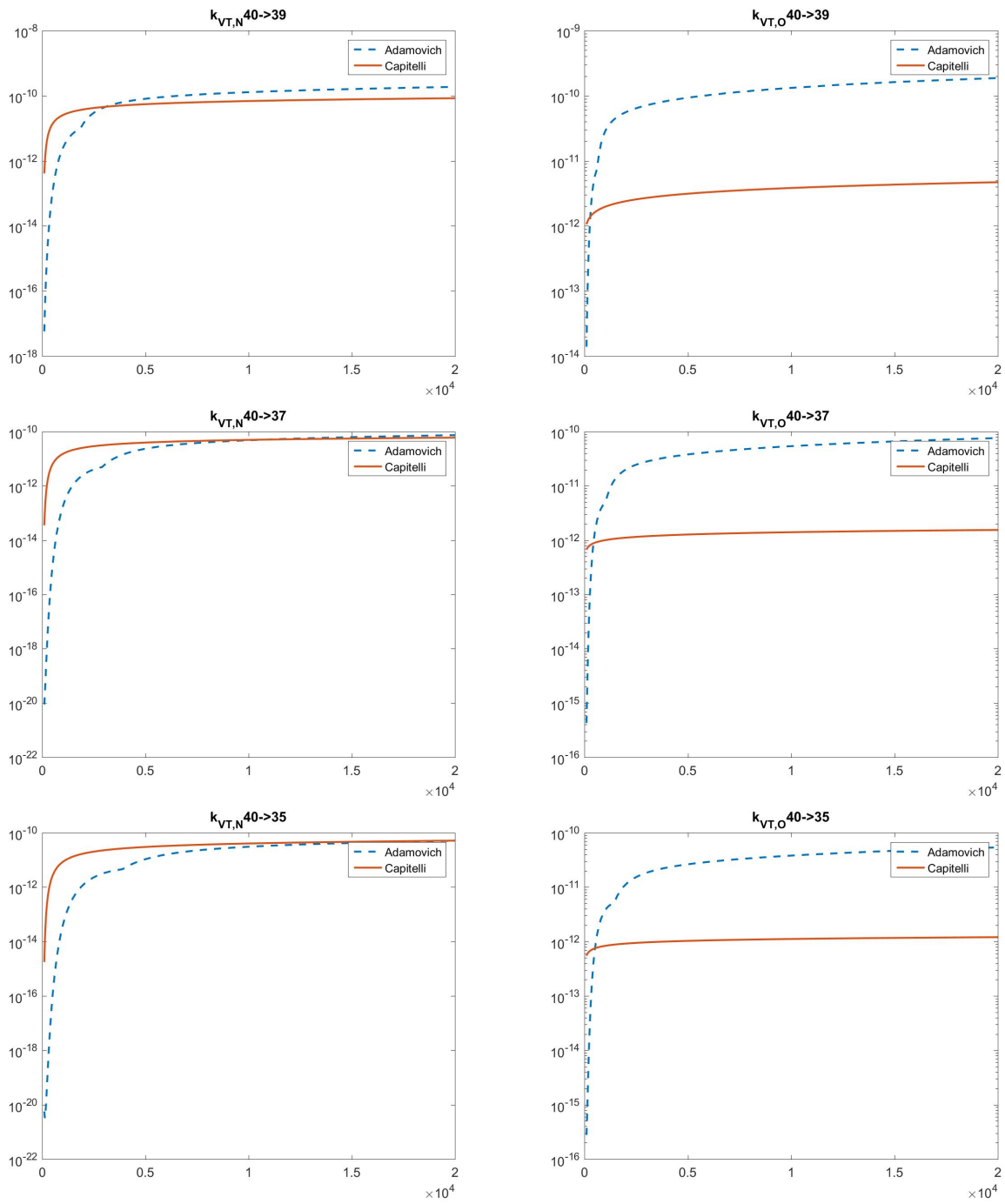


Рис. 2.4: Зависимость коэффициентов скорости VT переходов с 40-го колебательного уровня для моделей FHO [9] и Капителли [3] в азоте (слева) и в кислороде (справа) от T, K .

2.1.3 Коэффициенты скорости диссоциации

Скорость изменения заселенностей колебательных уровней молекул вследствие диссоциации и рекомбинации определяется выражением:

$$R_i^{diss-rec} = \sum_{d=a,m} n_d (k_{rec,i}^d n_a^2 - k_{i,diss}^d n_i). \quad (2.17)$$

Будем рассматривать модель Тринора-Маррона [2], допускающую диссоциацию с любого уровня. Коэффициент скорости диссоциации молекулы с уровня i запишется в следующем виде [1]:

$$k_{i,diss}^d = Z_i^d(T) k_{diss,eq}^d(T), \quad (2.18)$$

$k_{diss,eq}^d(T)$ — осредненный с учетом термически равновесного однотемпературного бoльцмановского распределения коэффициент скорости диссоциации, для его вычисления может быть использован закон Аррениуса:

$$k_{diss,eq}^d = AT^n \exp\left(-\frac{D}{kT}\right), \quad (2.19)$$

T — температура газа; D — энергия диссоциации молекулы; d — химический сорт партнера по столкновению; коэффициенты A и n обычно получают на основе экспериментальных данных, таблицы для этих коэффициентов можно найти в работах [10, 11], в частности, в настоящей работе использовались значения: $A = 3.7 \cdot 10^{21}$, $n = -1.6$. Z_i^d — множитель, учитывающий неравновесность (фактор неравновесности).

$$Z_i(T) = Z_i(T, U) = \frac{Z^{vibr}(T)}{Z^{vibr}(-U)} \exp\left[\frac{\varepsilon_i}{k} \left(\frac{1}{T} + \frac{1}{U}\right)\right] \quad (2.20)$$

Z^{vibr} — равновесная колебательная статистическая сумма; ε_i — колебательная энергия; k — постоянная Больцмана. В настоящей работе колебательные энергии ε_i вычислены с помощью модели ангармонического осциллятора. Выражение для статистической суммы имеет вид:

$$Z^{vibr}(T) = \sum_i \exp\left(-\frac{\varepsilon_i}{kT}\right) \quad (2.21)$$

Для практического использования модели Тринора-Маррона важно подобрать значения параметра U так, чтобы они обеспечивали хорошее согласие значений коэффициентов с экспериментальными данными либо с результатами расчетов по более точным моделям. Возьмем $U = D/(6k)$, как рекомендованное в [1].

Коэффициент скорости рекомбинации $k_{rec,i}$ определяется из соотношения детального баланса:

$$k_{rec,i} = k_{i,diss} \left(\frac{m_m}{m_a^2} \right)^{3/2} h^3 (2\pi kT)^{-3/2} Z^{rot} \exp \left(-\frac{\varepsilon_i - D}{kT} \right), \quad (2.22)$$

h — постоянная Планка; m_a, m_m — массы частиц; Z^{rot} — вращательная статистическая сумма, для жесткого ротатора она представляется в виде:

$$Z^{rot} = \frac{8\pi^2 I_{A_2} kT}{\sigma h^2}, \quad (2.23)$$

где σ — фактор симметрии, для гомоядерных молекул $\sigma = 2$; I_{A_2} — момент инерции молекулы относительно оси вращения

$$I_{A_2} = \frac{h}{8\pi^2 B_e^{A_2} c}, \quad (2.24)$$

B_e — спектроскопическая вращательная постоянная, c — скорость света.

2.1.4 Уравнения сохранения

Рассмотрим уравнения (2.3) - (2.5) и запишем их в дифференциальной форме:

$$\rho dv = -v d\rho, \quad (2.25)$$

$$d(\rho v^2 + p) = v^2 d\rho + 2v\rho dv + dp = 0, \quad (2.26)$$

$$\rho = \sum_i m_m n_i + m_a n_a,$$

$$dp = kT dn + kndT, \quad \text{где } p = nkT,$$

$$n = \sum_i n_i + n_a,$$

$$d\left(h + \frac{v^2}{2}\right) = 0. \quad (2.27)$$

С учетом (2.25) уравнение (2.26) примет вид:

$$\rho v dv + dp = 0 \quad (2.28)$$

Рассмотрим более подробно уравнение (2.27):

$$h = \frac{\left(\frac{7}{2}\hat{R}_m T + \frac{1}{\rho_m} \sum_i \varepsilon_i n_i + \frac{\varepsilon_m}{m_m}\right) \rho_m}{\rho} + \frac{\left(\frac{5}{2}\hat{R}_a T + \frac{\varepsilon_a}{m_a}\right) \rho_a}{\rho}, \quad (2.29)$$

где $\varepsilon_m, \varepsilon_a$ — энергия образования молекулы или атома; \hat{R}_a, \hat{R}_m — газовые постоянные для атомов и молекул соответственно. Дифференциал энтальпии выражается через неизвестные следующим образом:

$$\begin{aligned} dh &= \frac{\partial h}{\partial T} dT + \frac{\partial h}{\partial n_a} dn_a + \sum_i \frac{\partial h}{\partial n_i} dn_i, \\ \frac{\partial h}{\partial n_a} &= \frac{\rho_m m_a}{\rho^2} (h_a - h_m), \\ \frac{\partial h}{\partial n_i} &= \frac{\varepsilon_i}{\rho} - \frac{m_m}{\rho \rho_m} \sum_i \varepsilon_i n_i + \frac{\rho_a m_m}{\rho^2} (h_m - h_a), \\ \frac{\partial h}{\partial T} &= \frac{\frac{7}{2}\hat{R}_m \rho_m}{\rho} + \frac{\frac{5}{2}\hat{R}_a \rho_a}{\rho}, \end{aligned}$$

где:

$$\begin{aligned}
h_m &= \left(\frac{7}{2} \hat{R}_m T + \frac{1}{\rho_m} \sum_i \varepsilon_i n_i + \frac{\varepsilon_m}{m_m} \right) \\
h_a &= \left(\frac{5}{2} \hat{R}_a T + \frac{\varepsilon_a}{m_a} \right) \\
\rho_a &= n_a m_a; \quad \rho_m = \sum_{i=0}^L n_i m_m \\
\rho &= \rho_m + \rho_a
\end{aligned}$$

Таким образом, закон сохранения энергии можно переписать через газодинамические переменные n_a , n_i , T , v .

2.2 Система уравнений в безразмерном виде

Для численного решения системы (2.1)-(2.5) необходимо обезразмерить входящие в нее уравнения. Для этого нужно ввести соответствующие характерные величины. Возьмем в качестве таких величин для переменной x — длину свободного пробега перед фронтом волны l_0 ; для скорости v и температуры T — их значения перед фронтом ударной волны v_0 и T_0 ; для заселенностей n_i и числа атомов n_a — общее число частиц перед фронтом N_0 . Длина свободного пробега получается из формулы:

$$l_0 = \frac{kT_0}{2\sqrt{\sigma_{mol}p_0}}, \quad (2.30)$$

где σ_{mol} — диаметр столкновения молекул.

Подставим в систему обезразмеренные величины:

$$x = \tilde{x}l_0; v = \tilde{v}v_0; T = \tilde{T}T_0; n_i = \tilde{n}_iN_0; n_a = \tilde{n}_aN_0 \quad (2.31)$$

и перепишем ее относительно $\tilde{x}, \tilde{v}, \tilde{T}, \tilde{n}_i, \tilde{n}_a$.

2.2.1 Уравнения для заселенностей

Сначала рассмотрим уравнения (2.1) - (2.2):

$$\begin{aligned}\frac{d(vn_i)}{dx} &= R_i^{vibr} + R_i^{diss-rec}, \quad i = 0, \dots, L, \\ \frac{d(vn_a)}{dx} &= -2 \sum_i R_i^{diss-rec}.\end{aligned}$$

После подстановки величин (2.31) домножим его на $\frac{l_0}{N_0 v_0}$, получим:

$$\frac{d(\tilde{v}\tilde{n}_i)}{d\tilde{x}} = \frac{l_0}{N_0 v_0} \cdot (R_i^{vibr} + R_i^{diss-rec}), \quad i = 0, \dots, L, \quad (2.32)$$

$$\frac{d(\tilde{v}\tilde{n}_a)}{d\tilde{x}} = -2 \frac{l_0}{N_0 v_0} \cdot \sum_i R_i^{diss-rec}. \quad (2.33)$$

2.2.2 Уравнение движения

Рассмотрим уравнение движения в дифференциальной форме (2.28), подставим в него безразмерные величины:

$$\begin{aligned}\rho &= \sum_{c,i} m_c n_{c,i} = n_0 \cdot \sum_{c,i} m_c \tilde{n}_{c,i} = m_0 N_0 \tilde{\rho}, \\ p &= nkT = N_0 T_0 k \tilde{n} \tilde{T} = N_0 k T_0 \tilde{p},\end{aligned}$$

где в качестве m_0 берется масса молекулы O_2 , получим:

$$m_0 v_0^2 N_0 \tilde{v} \tilde{\rho} d\tilde{v} + N_0 k T_0 d\tilde{p} = 0,$$

остается разделить на характерные величины:

$$\frac{m_0 v_0^2}{k T_0} \tilde{v} \tilde{\rho} d\tilde{v} + d\tilde{p} = 0. \quad (2.34)$$

2.2.3 Уравнение энергии

Теперь рассмотрим уравнение энергии (2.5) в дифференциальной форме:

$$d\left(h + \frac{v^2}{2}\right) = 0,$$

для обезразмеривания энтальпии можно взять множитель $\frac{kT_0}{m_0}$, тогда равенство можно переписать в виде:

$$d\left(\tilde{h} + \frac{m_0 v_0^2}{kT_0} \frac{\tilde{v}^2}{2}\right) = 0 \quad (2.35)$$

Таким образом можно записать систему (2.1)-(2.5) относительно безразмерных переменных $\tilde{x}, \tilde{v}, \tilde{T}, \tilde{n}_i, \tilde{n}_a$:

$$\frac{d(\tilde{v}\tilde{n}_i)}{d\tilde{x}} = \frac{l_0}{N_0 v_0} \cdot (R_i^{vibr} + R_i^{diss-rec}), \quad i = 0, \dots, L, \quad (2.36)$$

$$\frac{d(\tilde{v}\tilde{n}_a)}{d\tilde{x}} = -2 \frac{l_0}{N_0 v_0} \cdot \sum_i R_i^{diss-rec}, \quad (2.37)$$

$$\frac{m_0 v_0^2}{kT_0} \tilde{v} \tilde{\rho} d\tilde{v} + d\tilde{p} = 0, \quad (2.38)$$

$$d\left(\tilde{h} + \frac{m_0 v_0^2}{kT_0} \frac{\tilde{v}^2}{2}\right) = 0. \quad (2.39)$$

Теперь система готова к численному решению. Заметим также, что уравнения сохранения (2.3)-(2.5) удобно использовать для контроля за ходом интегрирования системы.

2.3 Интегрирование системы

Для численного интегрирования системы была написана, отлажена и оптимизирована программа в среде Matlab, для интегрирования использовался встроенный метод переменного порядка с адаптивным шагом интегрирования. Для решения требовалось записать систему в нормальной форме. Так как пакет Matlab ориентирован на быструю работу с данными в виде матриц и векторов, то для приведения системы к нормальной форме было использовано обращение матрицы коэффициентов и умножение ее на вектор правой части, в итоге система приобрела вид:

$$\frac{dy}{dx} = A^{-1}F, \quad (2.40)$$

где A — матрица коэффициентов системы (2.36)-(2.39); F — вектор правой части этой системы; y — вектор безразмерных переменных системы.

2.4 Распределение макропараметров за фронтом ударной волны

Расчеты проводились при следующих начальных условиях: число Маха $M_0 = 15$; $T_0 = 293K$; $p_0 = 100Pa$; $\frac{n_{N_2}}{n} = 1$, $n_a = 0$; начальное распределение частиц — равновесное больцмановское:

$$\frac{n_i}{N_0} = \frac{1}{Z_{vibr}(T_0)} \exp \left(-\frac{\varepsilon_i}{kT_0} \right).$$

Считаем колебательную релаксацию и химические реакции замороженными во фронте волны. Для пересчета начальных значений температуры, скорости и давления сразу за фронтом ударной волны использовались соотношения Ренкина-Гюгонио [12].

Ниже приведены относительные графики зависимостей газодинамических параметров от расстояния от фронта ударной волны, а также их отклонения при учете только одноквантовых и 1-3 квантовых переходов от результатов, полученных с учетом 1-5 квантовых переходов, в зависимости от расстояния от фронта ударной волны.

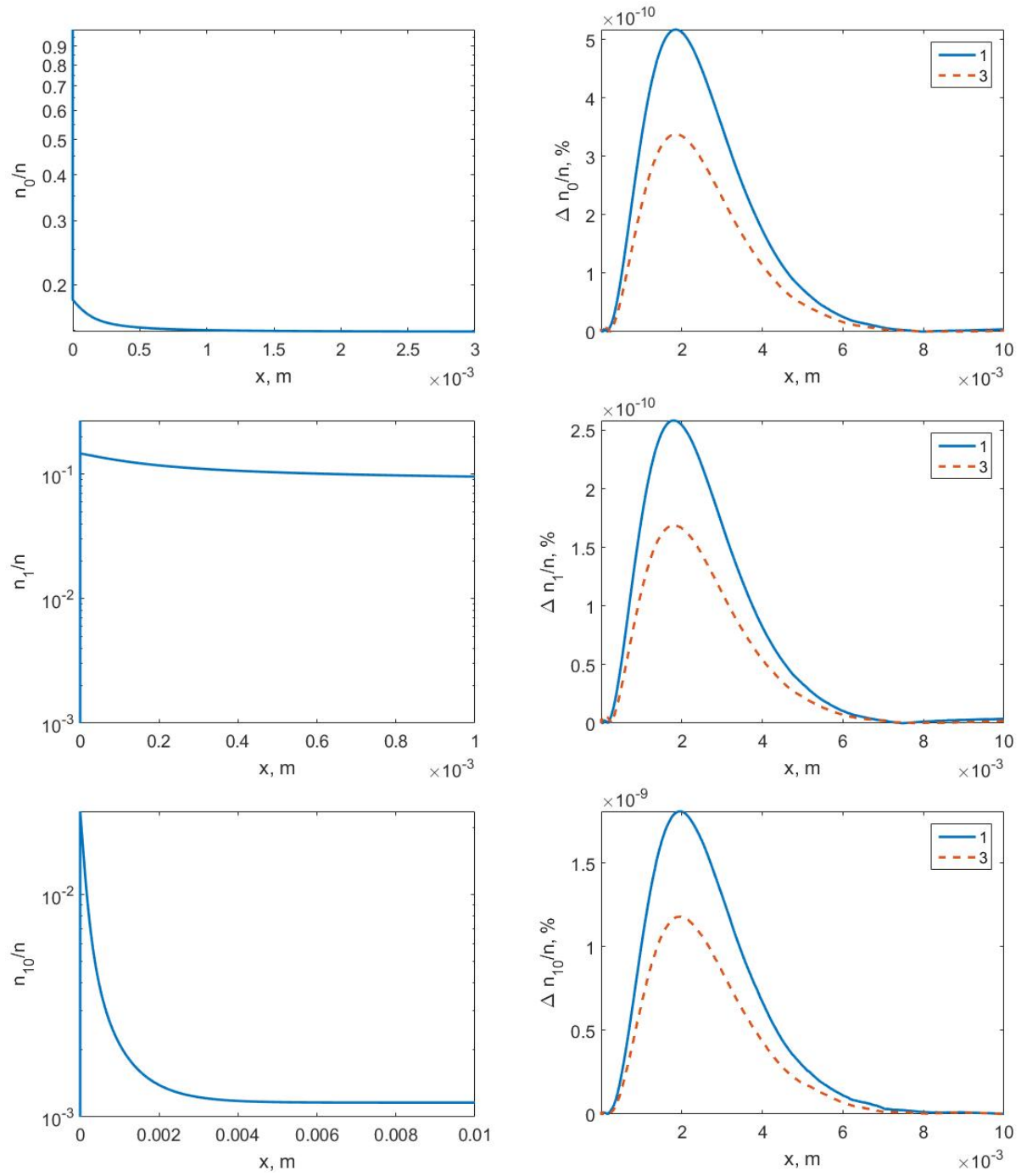


Рис. 2.5: Слева — зависимость безразмерных заселенностей колебательных уровней (0-го, 1-го и 10-го) от расстояния от фронта ударной волны, справа — относительное отклонение заселенностей рассчитанных с учетом только одноквантовых обменов (1), первых трех многоквантовых обменов (3) от результатов, полученных с учетом первых пяти (5) многоквантовых VT обменов.

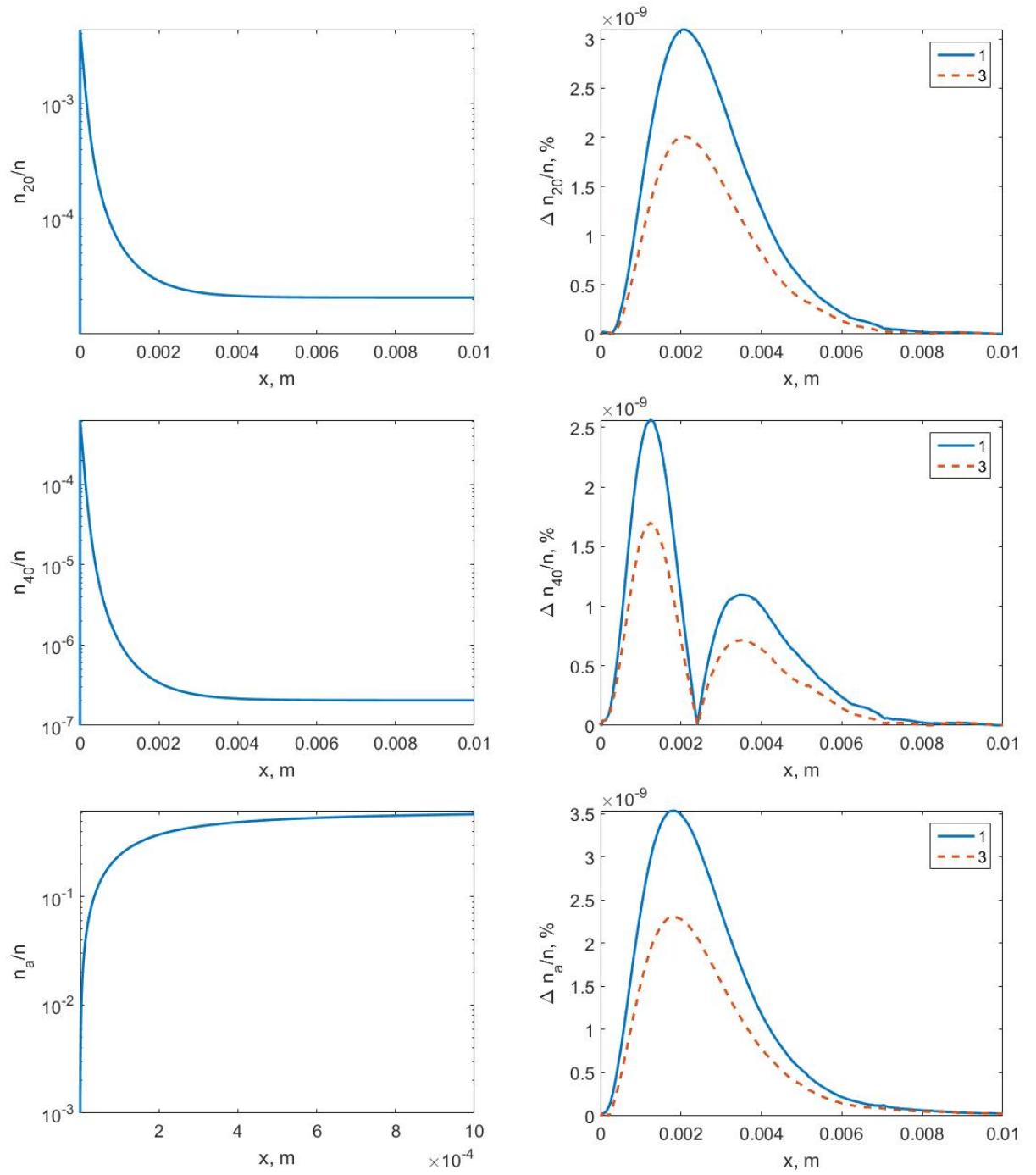


Рис. 2.6: Слева — зависимость безразмерных заселенностей колебательных уровней (20-го и 40-го), а также числовая плотность атомов O от расстояния от фронта ударной волны, справа — относительное отклонение заселенностей рассчитанных с учетом только одноквантовых обменов (1), первых трех многоквантовых обменов (3) от результатов, полученных с учетом первых пяти (5) многоквантовых VT обменов.

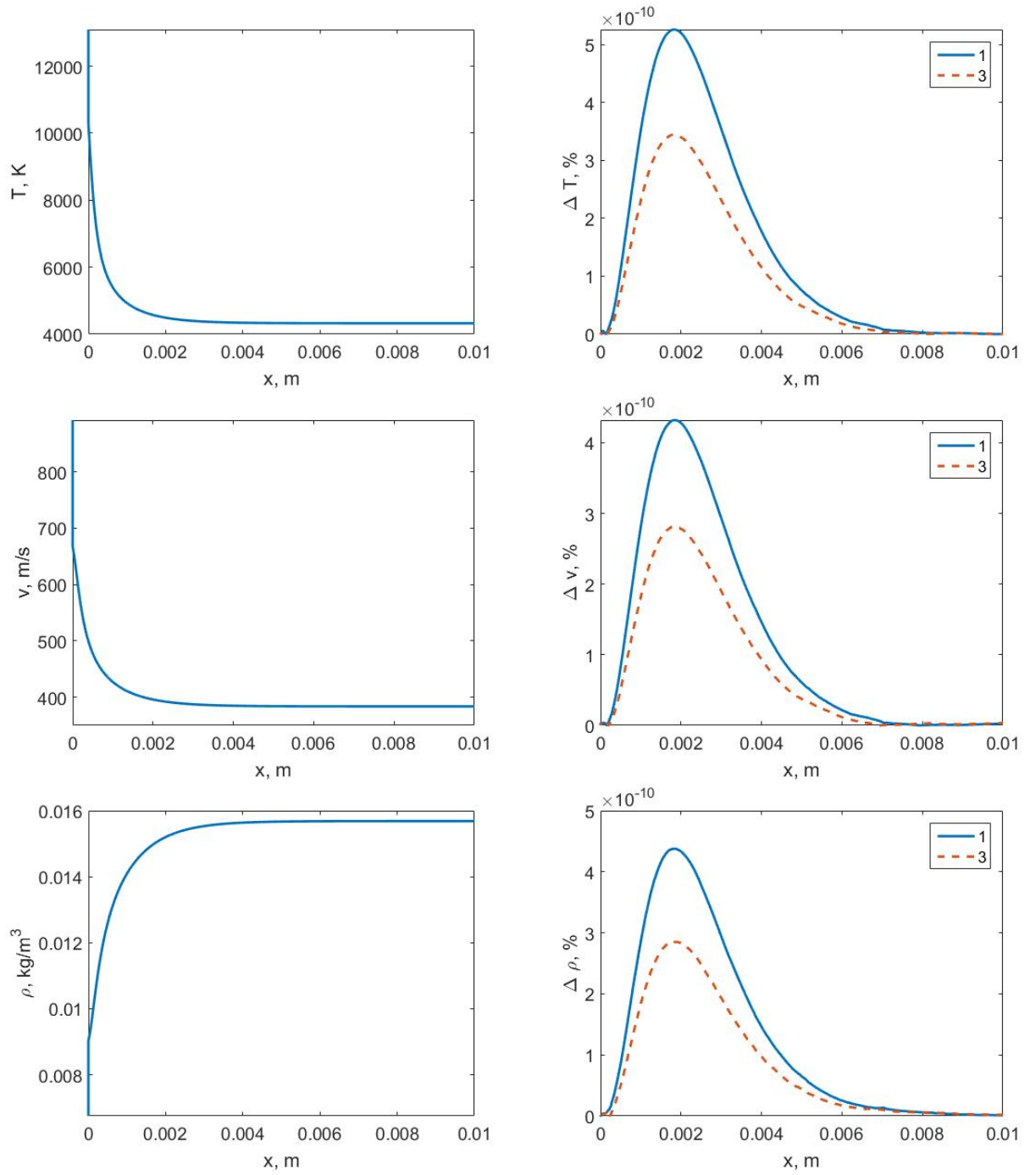


Рис. 2.7: Слева — зависимость температуры, скорости и плотности потока от расстояния за фронтом волны, справа — относительное отклонение этих величин рассчитанных с учетом только одноквантовых обменов (1), первых трех многоквантовых обменов (3) от результатов, полученных с учетом первых пяти (5) многоквантовых VT обменов.

Из рисунков видно, что для кислорода все рассмотренные газодинамические параметры очень мало зависят от количества учитываемых мно-

гоквантовых VT переходов. Таким образом, при моделировании течения за ударной волной в бинарной смеси O_2/O достаточно учесть только одноквантовые обмены. Ниже приведены несколько результатов для смеси N_2/N , представленных в работе [13].

На этих графиках видно, что в азоте многоквантовые переходы играют намного большую роль и при рассмотрении заселенностей их необходимо учитывать. Также видно, что релаксационные процессы в кислороде заканчиваются существенно быстрее, чем в азоте.

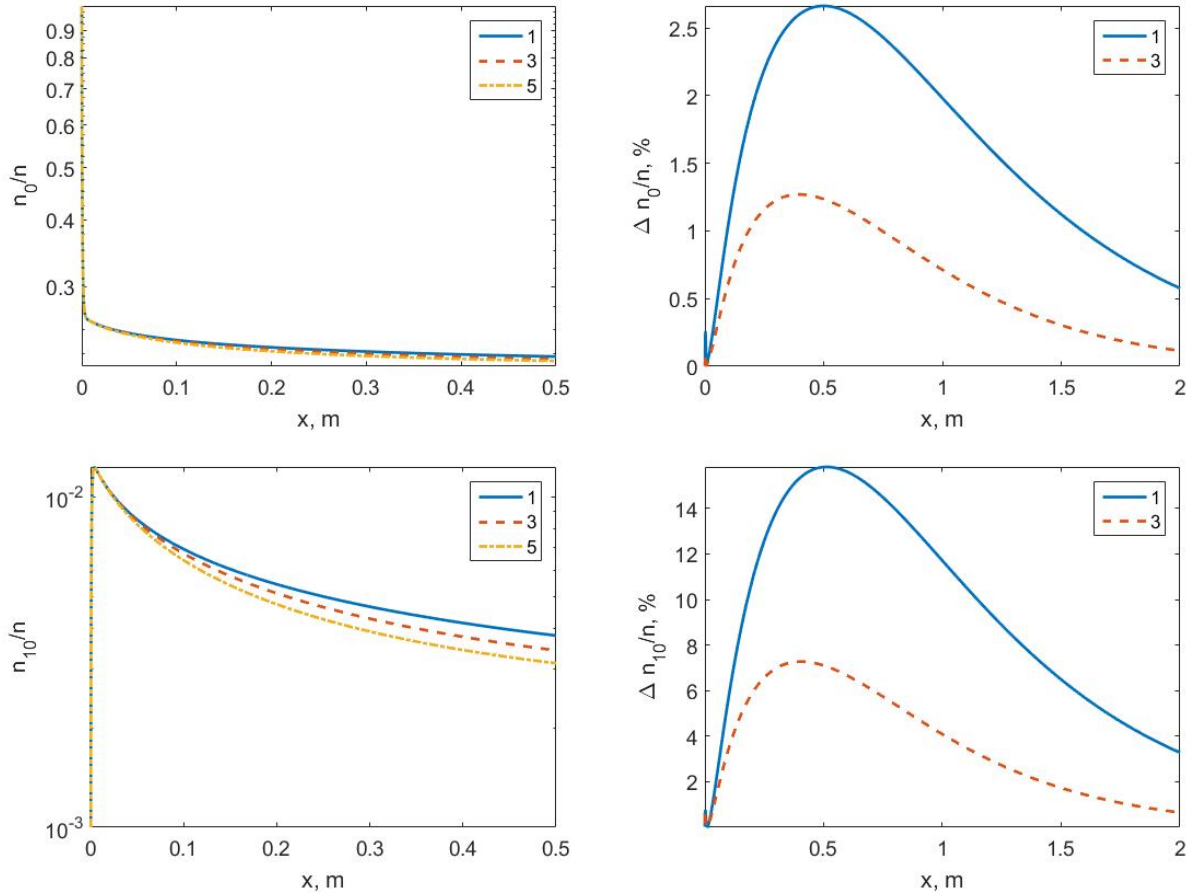


Рис. 2.8: Слева — зависимость безразмерных заселенностей колебательных уровней (0-го и 10-го) от расстояния от фронта ударной волны, справа — относительное отклонение заселенностей рассчитанных с учетом только одноквантовых обменов (1), первых трех многоквантовых обменов (3) от результатов, полученных с учетом первых пяти (5) многоквантовых VT обменов.

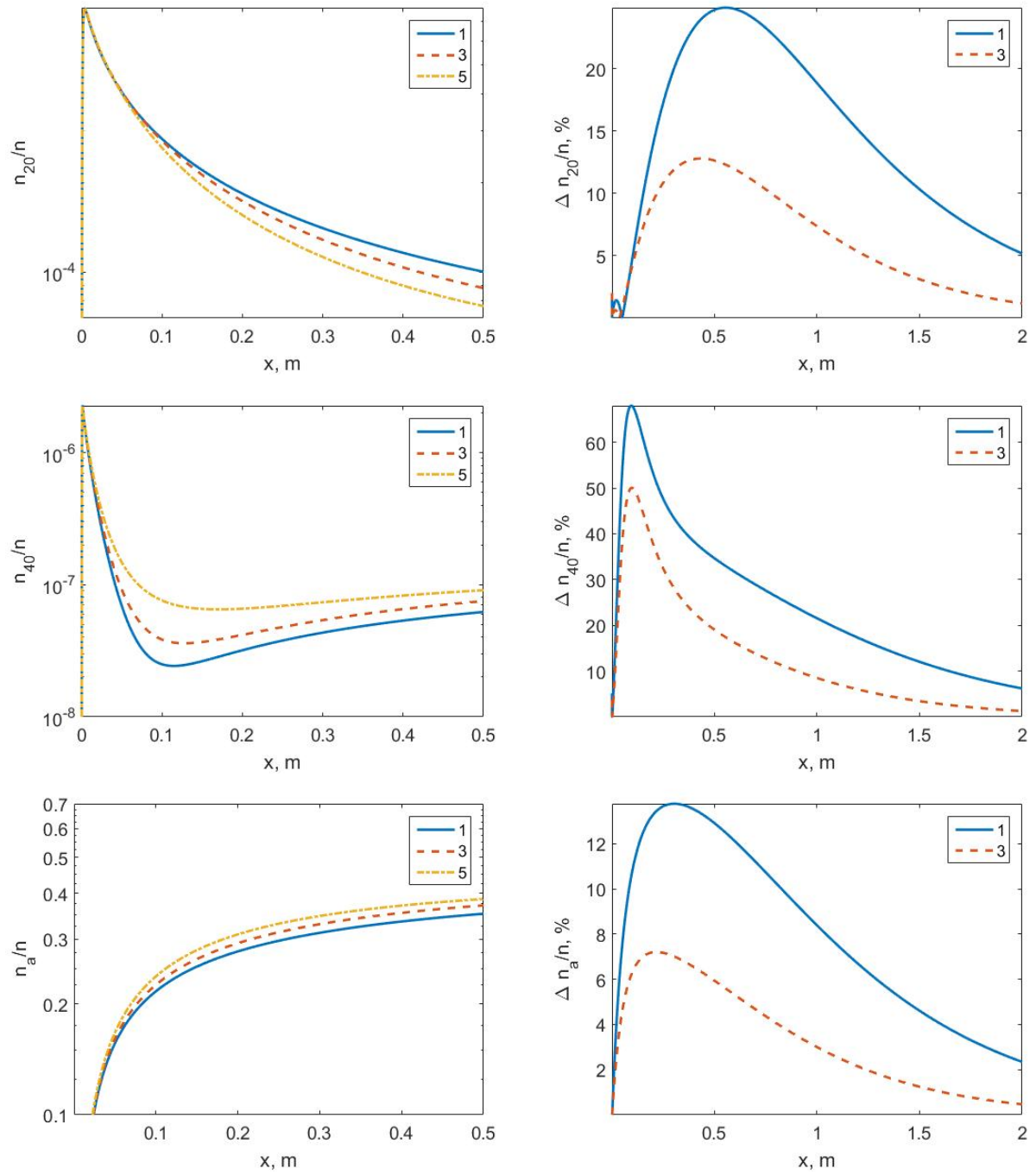


Рис. 2.9: Слева — зависимость безразмерных заселенностей колебательных уровней (20-го и 40-го), а также числовая плотность атомов N от расстояния от фронта ударной волны, справа — относительное отклонение заселенностей рассчитанных с учетом только одноквантовых обменов (1), первых трех многоквантовых обменов (3) от результатов, полученных с учетом первых пяти (5) многоквантовых VT обменов.

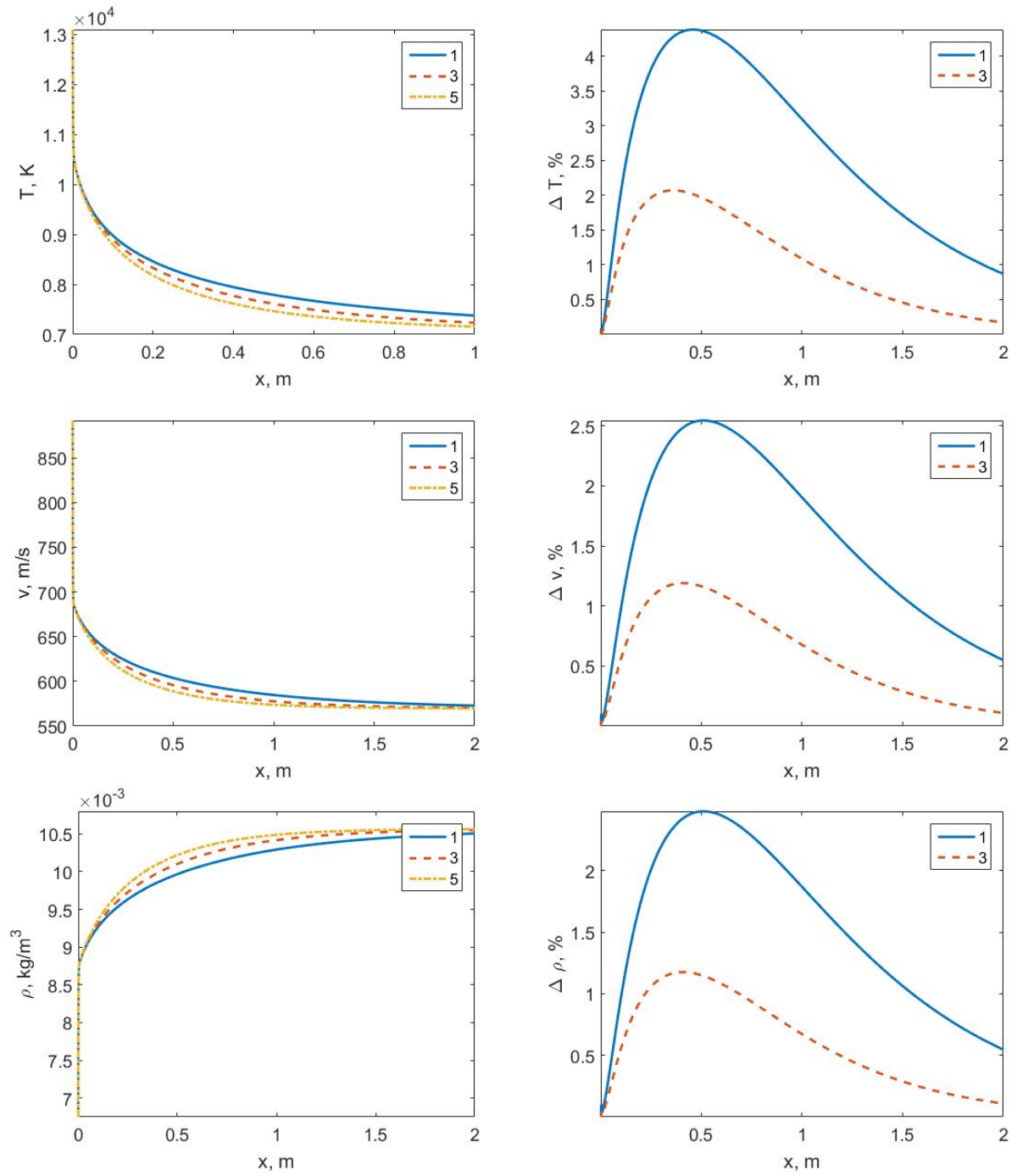


Рис. 2.10: Слева — зависимость температуры, скорости и плотности потока от расстояния за фронтом волны, справа — относительное отклонение этих величин рассчитанных с учетом только одноквантовых обменов (1), первых трех многоквантовых обменов (3) от результатов, полученных с учетом первых пяти (5) многоквантовых VT обменов.

Течение в пограничном слое у пластины

При моделировании обтекания твердого тела верхними слоями атмосферы также возникает задача о течении в пограничном слое. Рассмотрим течение в пограничном слое, образующемся на пластине в приближении поуровневой кинетики. Приведем уравнения, моделирующие такой поток, к виду, удобному для численного решения.

3.1 Система уравнений

Случай обтекания плоской пластины моделируется системой уравнений в частных производных [1]:

$$\frac{\partial}{\partial x}(n_{ci}v_x) + \frac{\partial}{\partial y}(n_{ci}v_y) + \frac{\partial}{\partial y}(n_{ci}V_{ciy}) = R_{ci}, \quad (3.1)$$

$$i = 0, \dots, L_c, c = N, N_2,$$

$$\rho \left(v_x \frac{\partial v_x}{\partial x} + v_y \frac{\partial v_x}{\partial y} \right) + \frac{dp}{dx} - \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial v_x}{\partial y} \right) = 0, \quad (3.2)$$

$$\rho \left(v_x \frac{\partial h}{\partial x} + v_y \frac{\partial h}{\partial y} \right) - v_x \frac{dp}{dx} + \frac{\partial q_y}{\partial y} - \eta \left(\frac{\partial v_x}{\partial y} \right)^2 = 0. \quad (3.3)$$

n_a — количество атомов; i — номер колебательного уровня; n_i — заселенности i -х колебательных уровней; ρ — плотность; v — скорость потока; p — давление; h — удельная энтальпия; R_i^{vibr} — скорости обменов колебательной энергией; $R_i^{diss-rec}$ — скорости диссоциации; V_{ciy} — компонента скорости диффузии, которая имеет вид:

$$V_{ciy} = - \sum_{dk} D_{cidk} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{n_{dk}}{n} \right) - \frac{D_{T_c}}{T} \frac{\partial T}{\partial y}, \quad (3.4)$$

где D_{cidk} , D_{T_c} — коэффициенты диффузии и термодиффузии соответственно:

$$D_{cidk} = \frac{1}{3n} [\mathbf{D}^{ci}, \mathbf{D}^{dk}], \quad D_{T_{ci}} = \frac{1}{3n} [\mathbf{D}^{ci}, \mathbf{A}] \quad (3.5)$$

\mathbf{A} , \mathbf{D} — векторные функции собственной скорости частиц, q_y — тепловой поток:

$$q_y = -\lambda' \frac{\partial T}{\partial y} - p \sum_{ci} D_{T_{ci}} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{n_{ci}}{n} \right) + \sum_{ci} \left(\frac{7}{2} kT + \varepsilon_i^c + \varepsilon_c \right) n_{ci} V_{ciy}, \quad (3.6)$$

где $\lambda' = \lambda_{tr} + \lambda_{rot} = \frac{k}{3} [\mathbf{A}, \mathbf{A}]$ — коэффициент теплопроводности. λ_{tr} и λ_{rot} описывают перенос энергии связанный с различными столкновениями. Алгоритм вычисления коэффициентов теплопроводности, диффузии и термодиффузии предложен в работе [1]. Он состоит в решении систем линейных алгебраических уравнений для коэффициентов разложения поправки первого порядка к функции распределения по полиномам Сонина и Вальдмана-Трубенбахера. Коэффициентами систем являются интегральные скобки, которые после преобразования можно выразить через стандартные $\Omega_{cd}^{(l,r)}$ интегралы и время релаксации вращательной энергии. Число уравнений сравнимо с общим числом колебательных состояний в смеси. Подробности можно найти в [1].

Для упрощения и обезразмеривания этой системы обычно применяют преобразование координат Лиза-Дородницына [1]:

$$\xi(x) = \int_0^x \mu_\delta \rho_\delta v_\delta dx \quad (3.7)$$

$$\eta(x, y) = \frac{v_\delta}{\sqrt{2\xi}} \int_0^y \rho dy. \quad (3.8)$$

индекс δ относится к параметрам на внешней границе пограничного слоя. Для упрощения вместо v_y вводится новая переменная V_y :

$$V_y = \frac{2\xi}{\partial\xi/\partial x} \left(F \frac{\partial\eta}{\partial x} + \frac{\rho v_y}{\sqrt{2\xi}} \right),$$

$$F = \frac{v_x}{v_\delta}, g = \frac{h}{h_\delta}.$$

Производные новых координат по старым:

$$\frac{\partial\xi}{\partial x} = \mu_\delta \rho_\delta v_\delta = \xi_x = \text{const}, \quad (3.9)$$

$$\frac{\partial\xi}{\partial y} = 0, \quad (3.10)$$

$$\frac{\partial\eta}{\partial x} = \frac{\xi_x}{2\xi} \eta, \quad (3.11)$$

$$\frac{\partial\eta}{\partial y} = \frac{v_\delta \rho}{\sqrt{2\xi}}. \quad (3.12)$$

Тогда:

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial\xi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\partial\eta}{\partial y} \frac{\partial}{\partial\eta} = \xi_x \frac{\partial}{\partial y} + \frac{\xi_x}{2\xi} \eta \frac{\partial}{\partial\eta}, \quad (3.13)$$

$$\frac{\partial}{\partial y} = \frac{\partial\eta}{\partial y} \frac{\partial}{\partial\eta} = \frac{v_\delta \rho}{\sqrt{2\xi}} \frac{\partial}{\partial\eta}. \quad (3.14)$$

Структура левых части уравнений практически одинакова, и в общем случае может быть записана следующим образом:

$$v_x \frac{\partial}{\partial x} + v_y \frac{\partial}{\partial y} = \frac{\xi_x v_\delta}{2\xi} \left(2\xi F \frac{\partial}{\partial\xi} + \frac{V}{2\xi} \frac{\partial}{\partial\eta} \right) \quad (3.15)$$

Подставим их в исходные уравнения и после ряда преобразований получим [14]

$$2\xi F \frac{\partial y_{ci}}{\partial\xi} + V_y \frac{\partial y_{ci}}{\partial\eta} + \frac{\partial J_{ciy}}{\partial\eta} = \tilde{R}_{ci} \quad (3.16)$$

$$2\xi F \frac{\partial F}{\partial\xi} + V_y \frac{\partial F}{\partial\eta} = \frac{\partial}{\partial\eta} \left(K \frac{\partial F}{\partial\eta} \right), \quad (3.17)$$

$$2\xi F \frac{\partial g}{\partial\xi} + V_y \frac{\partial g}{\partial\eta} = \frac{\partial}{\partial\eta} \left(\frac{K}{Pr} \frac{\partial g}{\partial\eta} \right) +$$

$$+ \frac{v_\delta^2}{h_\delta} K \left(\frac{\partial F}{\partial\eta} \right)^2 - \frac{\partial}{\partial\eta} \left(\frac{K}{Pr} \sum_c \left(\frac{\partial y_{ci}}{\partial\eta} \frac{h_c}{h_\delta} \right) \right) - \frac{\partial}{\partial\eta} \left(\sum_c J_{ciy} \frac{h_c}{h_\delta} \right) \quad (3.18)$$

Здесь введены переменные $y_{ci} = \frac{\rho_{ci}}{\rho}$ откуда $n_{ci} = y_{ci} \frac{\rho}{m_c}$. $J_{ciy} = \frac{\rho_c V_{ciy} \sqrt{2\xi}}{\xi_x}$ — безразмерный диффузионный поток, $\tilde{R}_{ci} = R_{ci} \frac{2\xi}{\rho v_\delta \xi_x}$ — безразмерная скорость химических реакций, $K = \frac{\rho\mu}{\rho_\delta \mu_\delta}$ — параметер Чепмена-Рубезина.

Рассмотрим диффузионный поток с учетом введенных переменных:

$$\begin{aligned} V_{ciy} &= - \sum_{dk} D_{cidk} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{n_{dk}}{n} \right) - \frac{D_{T_c}}{T} \frac{\partial T}{\partial y} = - \frac{v_\delta \rho}{\sqrt{2\xi}} \left(\sum_{dk} D_{cidk} \frac{\partial x_{dk}}{\partial \eta} + \frac{D_{T_c}}{T} \frac{\partial T}{\partial \eta} \right) \\ q_y &= -\lambda' \frac{\partial T}{\partial y} - p \sum_{ci} D_{T_{ci}} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{n_{ci}}{n} \right) + \sum_{ci} \left(\frac{7}{2} kT + \varepsilon_i^c + \varepsilon_c \right) n_{ci} V_{ciy} = \\ &= - \frac{v_\delta \rho}{\sqrt{2\xi}} \cdot \left(\lambda' \frac{\partial T}{\partial \eta} + p \sum_{ci} D_{T_{ci}} \frac{\partial x_{ci}}{\partial \eta} \right) + \sum_{ci} \left(\frac{7}{2} kT + \varepsilon_i^c + \varepsilon_c \right) n x_{ci} V_{ciy} \end{aligned}$$

где $x_{dk} = \frac{n_{dk}}{n}$.

3.2 Граничные условия

Граничные условия на стенке для некаталитической поверхности $y = 0$ и на внешней границе пограничного слоя $y = \delta$ имеют вид:

$$\begin{aligned} y = 0 : \quad & v_{x_0} = v_{y_0} = 0, \\ & \frac{\partial n_i}{\partial y} \Big|_{y=0} = \frac{\partial T}{\partial y} \Big|_{y=0} = 0; \\ y = \delta : \quad & v_{x_\delta} = v_\delta, h = h_\delta, \\ & n_i^\delta = n_i^{eq}(T_\delta), \\ & \frac{\partial v_x}{\partial y} \Big|_{y=\delta} = 0. \end{aligned}$$

С учетом переменных Лиза-Дородницына граничные условия примут вид:

$$\begin{aligned}
 \eta = 0 : \quad & F_0 = V_{y_0} = 0, \\
 & \left. \frac{\partial n_i}{\partial \eta} \right|_{\eta=0} = \left. \frac{\partial T}{\partial \eta} \right|_{\eta=0} = 0; \\
 \eta = \eta_{max} : \quad & F_\delta = 1, g_\delta = 1, \\
 & y_c = y_c^{eq}(p_\delta, T_\delta), \\
 & \left. \frac{\partial F}{\partial \eta} \right|_{\eta=\eta_{max}} = 0.
 \end{aligned}$$

Таким образом система уравнений подготовлена к численному интегрированию. Для этого можно использовать решатели включенные в пакет Matlab PDE Toolbox, основанные на конечно-элементных методов или математический пакет Comsol. Решение данной системы для конкретных условий планируется в дальнейшей работе.

Заключение

В данной работе произведено сравнение двух моделей, описывающих многоквантовые VT переходы в смесях O_2/O и N_2/N , для дальнейших расчетов была использована модель Капителли, как наиболее актуальная на сегодняшний день. Были произведены расчеты для кислорода и азота с учетом различного количества многоквантовых обменов. Показано, что многоквантовые VT переходы могут по-разному влиять на газодинамические параметры для разных газов, в частности в случае кислорода влияние многоквантовых обменов незначительно, несмотря на то, что коэффициенты скорости VT переходов одного порядка; в азоте — наоборот, учет многоквантовых переходов оказывает существенное влияние на макропараметры потока. Также показано, что скорость релаксации азота и кислорода существенно различаются.

Система уравнений, описывающая движение в пограничном слое, была приведена к виду , удобному для численного интегрирования, и написана программа для вычисления всех входящих в данные уравнения коэффициентов. В дальнейшем планируется исследование влияния многоквантовых обменов на течение в пограничном слое.

Литература

- [1] Е.А. Нагнибеда, Е.В. Кустова. *Кинетическая теория процессов переноса и релаксации в потоках неравновесных реагирующих газов.* // СПб.: Изд. С.-Петербург. ун-та, 2003. 272 с.
- [2] Marrone P.V., Threanor C.E. *Chemical relaxation with preferential dissociation from excited vibration levels* // Phys. Fluids/ 1963/ Vol. 6. N 9. P. 1215-1221.
- [3] Fabrizio Espositoa, Iole Armenisea, Giulia Capittaa, Mario Capitellia, *O–O2 state-to-state vibrational relaxation and dissociation rates based on quasiclassical calculations* // Chemical Physics Volume 351, Issues 1–3, 3 July 2008, Pages 91–98
- [4] Capitelli M., Armenise I., Gorse C. *State-to-state approach in the kinetics of air components under re-entry conditions* // J. Thermophys. Heat Transfer. 1997. Vol. 11. N 4. P. 570-578
- [5] Billing G.D., Fisher E.R. *VV- and VT-rate coefficients in N₂ by a quantum-classical model* // Chem. Phys. 1979. Vol. 43. P. 395-401
- [6] Billing G.D., Kolesnick R.E. *Vibrational relaxation of oxygen. State to state rate constants* // Chem. Phys. Lett. 1992. Vol. 200. N 4. P. 382-386
- [7] A.J.C. Varandas & A.A.C.C. Pais, *A realistic double many-body expansion (DMBE) potential energy surface for ground-state O3 from a multiproperty fit to ab initio calculations, and to experimental spectroscopic, inelastic scattering, and kinetic isotope thermal rate data* // Molecular Physics: An International Journal at the Interface Between Chemistry and Physics, Volume 65, Issue 4, 1988
- [8] PHYS4ENTRY planetary entry integrated models seventh framework programme [интернет ресурс]: phys4entrydb.ba.imip.cnr.it/Phys4EntryDB/index.php.
- [9] Igor V. Adamovich, Sergey O. Macheret, J. William Rich, Charles E. Treanor *Vibrational Energy Transfer Rates Using a Forced Harmonic Oscillator Model* // Journal of Thermophysics and Heat Transfer Vol. 12, No. 1, January-March 1998

- [10] Ступоченко Е.В., Лосев С.А., Осипов А.И. *Релаксационные процессы в ударных волнах.* // М.: Наука, 1965. 484 с.
- [11] *Неравновесные физико-химические процессы в аэродинамике* // Под ред. Г.И. Майкапара. М.: Машиностроение, 1972. 344 с.
- [12] А.В. Белова, А.И. Буравцев. *Руководство к лабораторным работам по аэрогазодинамике* // СПб.: Изд-во С.-Петерб.ун-та, 2004.-344с.
- [13] Л.Д. Мишин, Е.В. Кустова *О влиянии многоквантовых обменов на газодинамические параметры в релаксационной зоне за ударной волной* // Вестн. С.-Петерб. ун-та. Сер. 1 : Математика, механика, астрономия. 2016. Вып. 2.
- [14] Е.В. Кустова. *Уравнения теории пограничного слоя.* // СПб.: Изд. С.-Петерб. ун-та, 2003. 272 с.